

МАГНИТНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ В ХЛОРИДЕ МЕДИ CuCl_2

Комлева Е.В.^{*}, Николаев С.А., Мазуренко В.Г.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
г. Екатеринбург, Россия

E-mail: kewi999@mail.ru

MAGNETIC ORDERING IN COPPER CHLORIDE CuCl_2

Komleva E.V.^{*}, Nikolaev S.A., Mazurenko V.G

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

In this study, we carried out ab initio calculations of the electronic structure using VASP program package [1], performing calculations in the framework of density functional theory and determined the magnetic configuration of the ground state in the copper chloride CuCl_2 .

Мультиферроиками называют материалы, в которых магнитный порядок и электрическая поляризация сосуществуют одновременно в одной фазе. Так как в современной электронике широко применяется преобразование энергии переменного магнитного поля в электрическое поле и наоборот, а физический предел устройств, использующих для этого явление электромагнитной индукции, практически достигнут, одним из наиболее перспективных направлений применения мультиферроиков является их использование для создания перестраиваемых магнетооптических и магнетоэлектрических запоминающих устройств.

На основании экспериментальных данных о длине связи и углах кристаллической структуры соединения CuBr_2 , в работе [2] было предсказано 5 путей спинного обмена. Полагая аналогию в магнитных свойствах галогенидов, в нашей работе были приняты аналогичные конфигурации магнитного упорядочения для хлорида меди. Таким образом, нами были проведёны расчёты электронной плотности для 6 магнитных конфигураций (FM и AFM1-AFM5). В каждом случае для расчётов была выбрана суперячейка, позволяющая описать конкретный магнитный порядок.

Для корректного описания одноузельных электронных корреляций в 3d-оболочке меди, в наших расчетах был использован метод LDA+U[3]. Расчёты были проведены для ненулевого эффективного параметра кулоновского взаимодействия, а затем для сравнения значение параметра было положено равным нулю.

Наши расчеты показали, что при учёте одноузельного кулоновского взаимодействия энергетически выгодным является AFM5 упорядочение, в то время как без учёта данного эффекта наиболее выгодным представляется AFM4 порядок.

Рассчитанные энергии для различных видов магнитного
упорядочения в CuCl_2 .

Магнитное состояние	Энергия в расчёте на одну формульную единицу, эВ	
	U=0	U=7
FM	-21,20253992	-17,3610792
AFM1	-21,23212238	-17,37338117
AFM2	-21,19813945	-17,34638137
AFM3	-21,19561788	-17,35524367
AFM4	-21,28520833	-17,36915965
AFM5	-21,27613881	-17,41920988

В дальнейшей работе в рамках первопринципных расчетов электронной структуры будут исследованы микроскопические механизмы магнитных взаимодействий CuCl_2 , а также рассчитаны колебательные спектры.

1. G. Kresse, J. Hafner, Phys. Rev. B, 47, 558 (1993).
2. C.Lee, Jia Liu et al., Phys. Rev. B, 86, 060407 (2012).
3. A.I.Liechtenstein, V.I. Anisimov et al., Phys. Rev. B, 52, R5467 (1995).

ПРИМЕНЕНИЕ ГРАДИЕНТОМЕТРА ВТОРОГО ПОРЯДКА В МАГНИТОИЗМЕРИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ

Потанина Ю.В.^{1*}, Куликова Т.В.¹, Волегова Е.А.^{1,2},
Степанова Е.А.¹, Волегов А.С.^{1,2}

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²) ФГУП «Уральский научно-исследовательский институт метрологии»,
г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: yuliapotanina@rambler.ru

APPLICATION OF THE SECOND ORDER GRADIOMETER IN MAGNETIC MEASUREMENT SYSTEMS

Potanin Yu.V.^{1*}, Kulikova T.V.¹, Volegova E.A.^{1,2}, Stepanova E.A.¹, Volegov A.S.^{1,2}

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²) Ural Research Institute for Metrology (UNIIM), Yekaterinburg, Russia

It was estimated characteristics of magnetic measurements precision of equipment using second order gradiometer by the natural and computer experiments. Natural experiments were produced using magnetic property measurement system MPMS-XL-7. Finite element method realized in COMSOL Multiphysics was used for computer experiment.